



TITLE:

エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価

AUTHOR(S):

内藤, 悠太

CITATION:

内藤, 悠太. エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2020, 2019: 34-34

ISSUE DATE:

2020-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/251114>

RIGHT:

エポキシ樹脂の架橋反応による構造形成と力学特性発現の関係の評価

Evaluation of Structure-Property Relationship of Epoxy Resin via Crosslinking
Reaction

京都大学 工学研究科 機械理工学専攻適応材料力学研究室 内藤悠太

研究成果概要

本研究では、先進材料である炭素繊維強化プラスチック(Carbon Fiber Reinforced Plastic; CFRP)の成形性に大きな影響を与えるマトリクス樹脂の、硬化に伴う粘性変化のメカニズムをモノマーの分子構造から明らかとすることを目的に、代表的なCFRPのマトリクス樹脂であるエポキシ樹脂の架橋反応における構造変化と硬化過程の粘度変化の関係を評価した。

手法としては、岡部らが提案した反応障壁と生成熱を確率論的に考慮した架橋反応解析¹⁾により硬化途中のエポキシ樹脂の構造を取得し、それぞれの構造に対してLees-Edwardsの境界条件による粘度評価²⁾を実施することで、硬化度別の粘度を取得した。

本評価により、全原子分子動力学法を活用した場合においても、熱硬化性樹脂に広く用いられる巨視的な粘度式であるCastro-Macosko式³⁾に基づく温度・硬化度依存性を示すこと、モノマー構造によって発現する粘度が変化する挙動が解析できることが明らかとなった。全原子分子動力学法により得られる粘度は、現実からほど遠いひずみ速度による評価となるものの、モノマー構造差を横並びに評価する上で有用であることが示唆された。また、得られた分子構造分布から、平均分子量や分子の枝分かれ構造を直接評価することも可能であり、これらの評価により各組成の粘度変化率が重量平均分子量の変化率に支配されること、重量平均分子量の粘度上昇に対する寄与率が、分子鎖長によって変化することなど、モノマー構造が生み出す粘度の変化過程を、全原子モデリングで明らかとすることができた。今後、CFRPの成形性に影響の大きいゴム状態弾性率についても同様の検討を実施する予定である。

引用文献

- 1) T. Okabe, T. Takehara, K. Inose, N. Hirano, M. Nishikawa, T. Uehara, Polymer. 54 (2013) 4660–4668.
- 2) A.W. Lees, S.F. Edwards, Journal of Physics C: Solid State Physics. 5 (1972) 1921–1928.
- 3) J. M. Castro and C. W. Macosko, AIChE Journal. 28 (1982) 250-260.

発表論文 なし

2020年3月に投稿予定である。